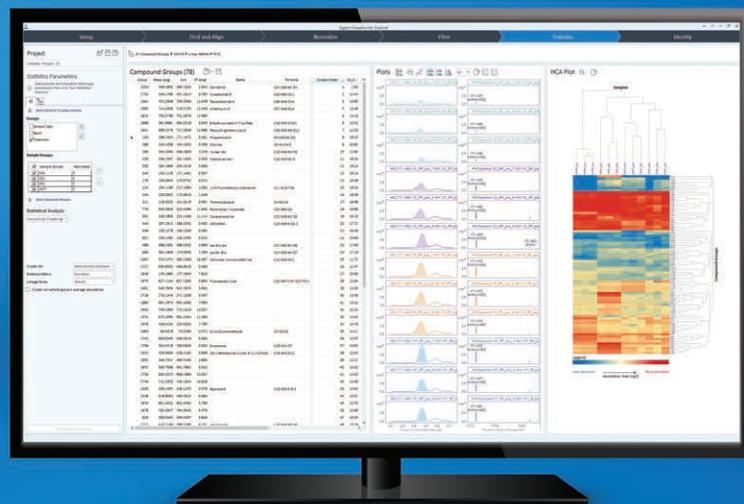


# 복잡한 데이터에서 중요한 통찰력 도출

비표적 LC/Q-TOF 데이터용 Agilent MassHunter Explorer 소프트웨어





Agilent MassHunter Explorer

Setup Find and Align Normalize Filter Statistics

Project: Project-01

Statistics Parameters

Compound Groups (728)

Group	Mass (m/z)	RT (min)	Abundance	p-value	p(CA)	p(CC)	p(FK)
2	224.1422	225.1494	8.590	5.23E-10	3.85E-7	2.31E-4	2.34E-4
140	448.2833	449.2907	8.590	1.21E-8	4.10E-7	2.31E-4	2.37E-4
28	332.1793	333.1824	8.744	2.13E-9	4.10E-7	2.31E-4	2.67E-4
13	276.1732	279.1624	9.251	2.79E-9	4.10E-7	2.31E-4	3.46E-4
1148	559.3156	560.3283	9.831	3.05E-9	4.10E-7	1.00E-2	3.00E-2
731	414.2742	415.2832	9.147	3.38E-9	4.10E-7	2.31E-4	2.31E-4
30	210.1108	211.1180	9.777	6.58E-9	6.18E-7	2.31E-4	2.31E-4
232	392.2833	393.2909	11.998	8.80E-9	6.18E-7	2.31E-4	2.31E-4
536	454.2381	477.2329	5.055	8.60E-9	6.96E-7	1.00E-2	1.57E-2
513	958.5341	480.2849	9.763	1.74E-9	1.27E-6	2.31E-4	4.48E-4
1387	1224.2904	1227.2998	14.283	3.44E-9	2.28E-6	1.27E-6	2.31E-4
979	522.2955	523.3024	9.231	4.99E-9	2.66E-6	2.31E-4	4.97E-4
927	786.6215	394.2162	12.961	5.51E-9	3.28E-6	2.31E-4	2.31E-4
1241	958.5104	480.2849	9.231	7.74E-9	4.02E-6	2.31E-4	2.38E-4
163	392.2885	393.3039	12.731	9.25E-9	4.49E-6	2.31E-4	2.49E-4
19	563.3460	575.3354	9.779	1.08E-9	4.87E-6	2.31E-4	3.68E-4
724	954.5741	955.5789	13.178	1.14E-9	4.87E-6	2.31E-4	2.32E-4
47	294.1840	317.1736	8.927	1.27E-9	5.12E-6	2.31E-4	6.11E-4
515	144.0854	165.0933	7.281	1.59E-9	6.01E-6	2.31E-4	5.19E-4
841	578.2789	293.1467	8.990	1.65E-9	6.01E-6	2.31E-4	4.42E-4

ANOVA - Post Hoc Results

Group	[WT]	[CA]	[CC]	[FK]
[WT]	728	544	354	431
[CA]	134	729	289	225
[CC]	374	429	718	290
[FK]	107	500	418	718

Legend: Differentially abundant (blue), Not Differentially abundant (orange)

Results Summary

	p=0.05	p<0.01	p<0.001	p<0.005	p<0.001
Corrected p-value	728	728	706	559	447
Expected by chance	86	14	5	3	3

# 빠르고 신뢰할 수 있으며 간단한 비표적 데이터 분석을 위한 LC/Q-TOF의 최고 동반자를 만나세요

고분해능 Agilent LC/Q-TOF 기기는 뛰어난 정밀도, 정확도 및 동적 범위로 풍부한 비표적 데이터를 제공합니다. 풍부한 데이터는 깊고 포괄적인 통찰력을 제공할 수 있지만 관심 화합물을 찾고 식별하는 일은 어렵습니다.

MassHunter Explorer는 비표적 데이터를 보다 쉽고 빠르게 스마트하게 분석하도록 설계되었습니다. 통합 사용자 인터페이스는 고급 데이터 추출과 정규화, 통계 분석, 시각화 및 식별 절차를 원활하게 결합합니다. 사용하기 쉬운 하나의 응용 프로그램에 결합된 이러한 도구는 데이터에 대한 통찰력을 빠르고 자신 있게 찾을 수 있게 도와주어 연구 생산성을 높입니다.

Agilent MassHunter 소프트웨어 제품군의 일부인 MassHunter Explorer는 시료마다 다른 화합물 또는 다른 조건의 시료 그룹을 찾아야 하는 Q-TOF LC/MS 비표적 스크리닝 응용 분야에 적합합니다.



식품



환경 분석



추출물 및 침출물  
(E&L)



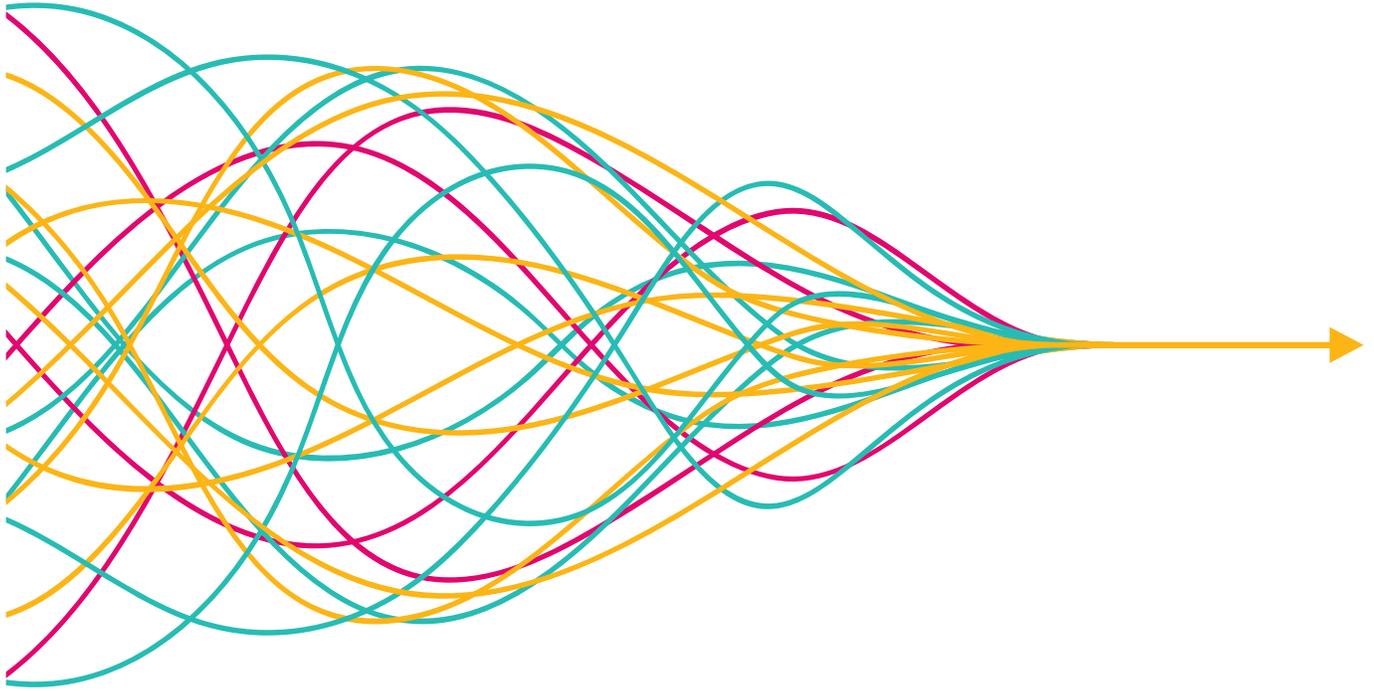
법독성학



오믹스



천연물



## 복잡한 데이터를 명료한 통찰력으로 바꾸기 위한 간단하고 효율적인 경로

초보 사용자와 고급 사용자 모두에게 적합하도록 설계된 MassHunter Explorer는 포괄적인 분석과 시각화를 하나의 패키지로 제공합니다. 직관적인 워크플로 기반의 인터페이스는 실험 설정, 데이터 추출, 차등 분석을 사용한 관심 화합물 찾기와 식별 과정을 안내합니다.

분석 결과의 단순화된 표시와 함께 상당한 성능 향상을 통해 비표적 워크플로에 대한 경험이 있든 없든 데이터를 처리하고 데이터로부터 유용한 정보를 얻는 것이 더 쉬워집니다.

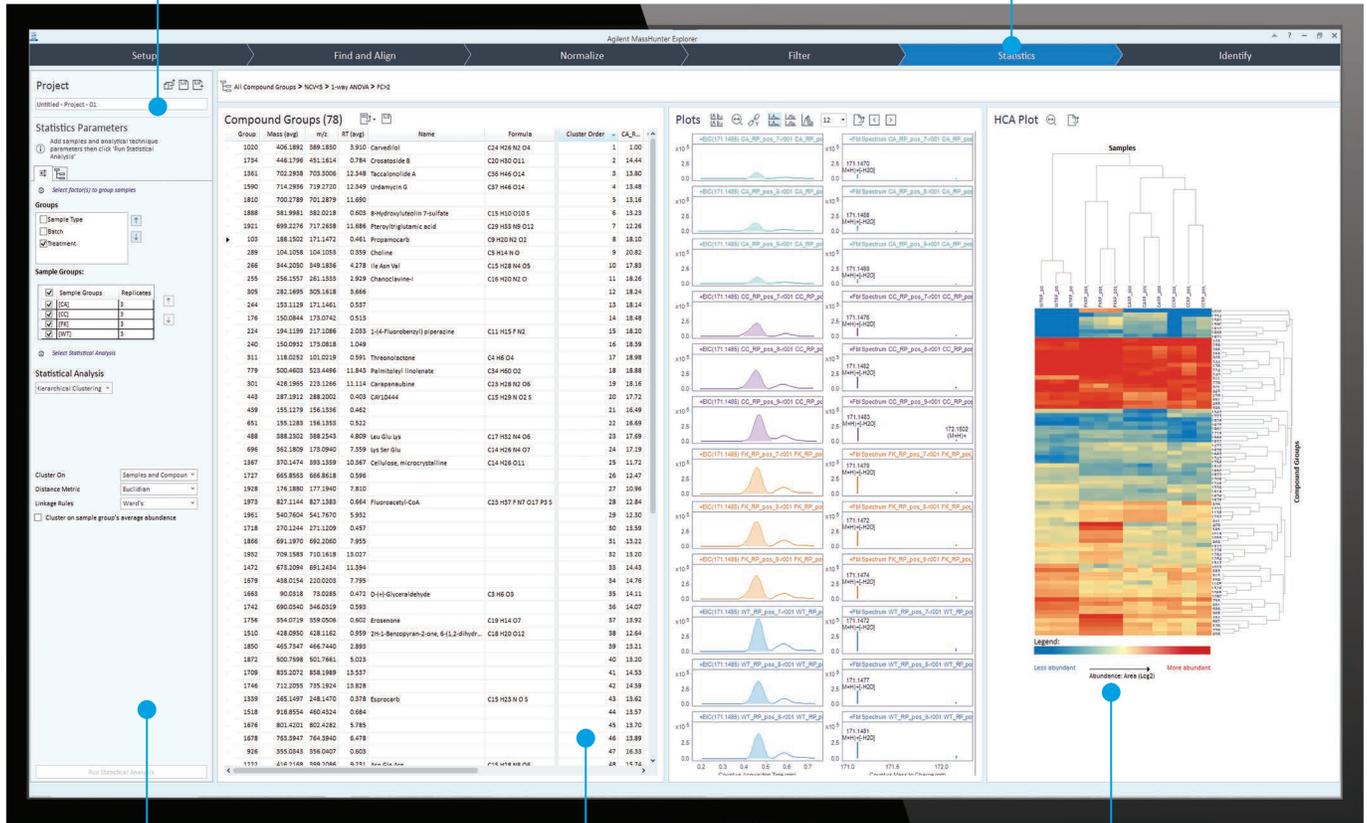
초보 사용자는 사전 로드되는 최적화된 설정으로 데이터를 탐색할 수 있고, 고급 사용자는 덜 일반적인 응용 작업에 맞게 설정을 조정할 수 있습니다.

필요한 경우, 데이터를 MassHunter Qualitative 및 Quantitative 데이터 분석 소프트웨어 또는 Mass Profiler Professional, R 및 Python과 같은 고급 통계 분석 프로그램으로 쉽게 내보낼 수 있습니다.

# Agilent MassHunter Explorer: 통합되고 직관적인 워크플로

프로젝트 기반 워크플로를 통해 초보자와 전문가 모두 쉽게 설정을 지정하고 이전할 수 있습니다.

능률적이고 통합된 절차로 탐색을 단순화합니다.



다수의 통계 알고리즘이 주어진 데이터에 적합한 도구를 제공합니다.

수집 중 전처리가 이루어지므로 데이터 처리가 빠릅니다.

빠른 검토를 위해 크로마토그래피, 스펙트럼 및 통계 데이터가 그림으로 표시됩니다.

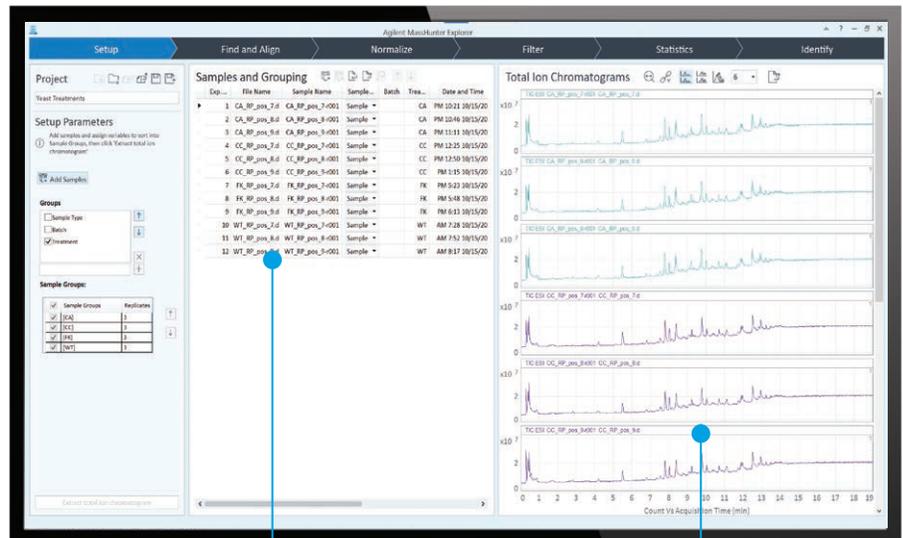
MassHunter Explorer는 비표적 스크리닝에 필요한 설정 조건 지정, 데이터 추출, 정규화, 필터링, 통계 분석 및 식별 절차를 안내합니다. 초보 사용자는 전문가가 만든 프로세싱 method를 사용하여 학습 곡선을 단축할 수 있습니다. 조직 전체에서 분석법을 공유하여 일관된 결과를 보장하고 오류를 최소화할 수도 있습니다.



## 간단한 단계만 거쳐 근본적인 결과를 밝히고 중점적으로 연구

### 실험 설계 설정

획득한 데이터를 추가하고 각 시료에 대한 시료 유형(새로운 통합 QC 옵션 포함), 배치 및 맞춤 그룹화 변수를 정의하여 시작합니다. 다음 단계를 진행하기 전에 재현성을 검토할 수 있도록 크로마토그램을 정렬하고 색상을 지정하고 중첩시킬 수 있습니다.

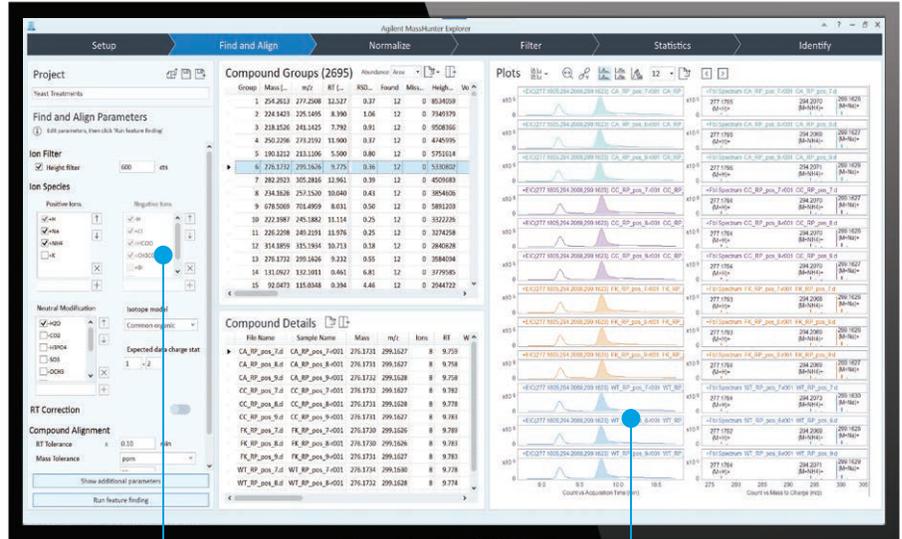


시료를 로드하고 각 시료와 연결된 그룹을 정의합니다.

크로마토그램을 검토하여 재현성을 확인합니다.

## 모든 시료에서 화합물을 찾고 정렬하기

찾기 및 정렬 단계에서는 비표적 알고리즘을 사용하여 각 시료에서 화합물을 추출한 다음, 시료 전체에서 질량과 머무름 시간을 기준으로 화합물을 정렬합니다.

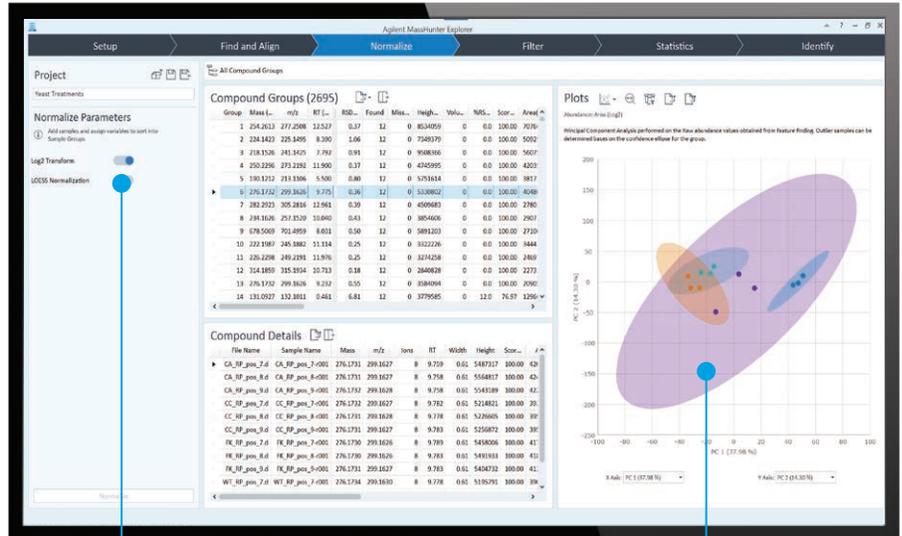


시료 화학 조성을 기반으로 파라미터를 평가합니다.

추출된 이온 크로마토그램 및 스펙트럼을 검토합니다.

## 데이터 정규화 및 필터링으로 원치 않는 변형 제거

원치 않는 계통적 오류는 시료 전처리 또는 기기 변동으로 인해 발생하며 배치 간 변동으로 이어질 수 있습니다. 이러한 오류는 LOESS(locally estimated scatterplot smoothing) 정규화 기술을 사용하여 조정할 수 있습니다. 존재비, 재현성 또는 특정 시료 그룹의 존재 여부를 기준으로 필터를 적용하여 관심 화합물에 중점을 둘 수 있습니다. 이러한 단계 전반에 걸쳐 주성분 분석(PCA)을 통해 정규화 및 필터링 프로세스가 적용될 때 데이터 품질을 검토할 수 있습니다.

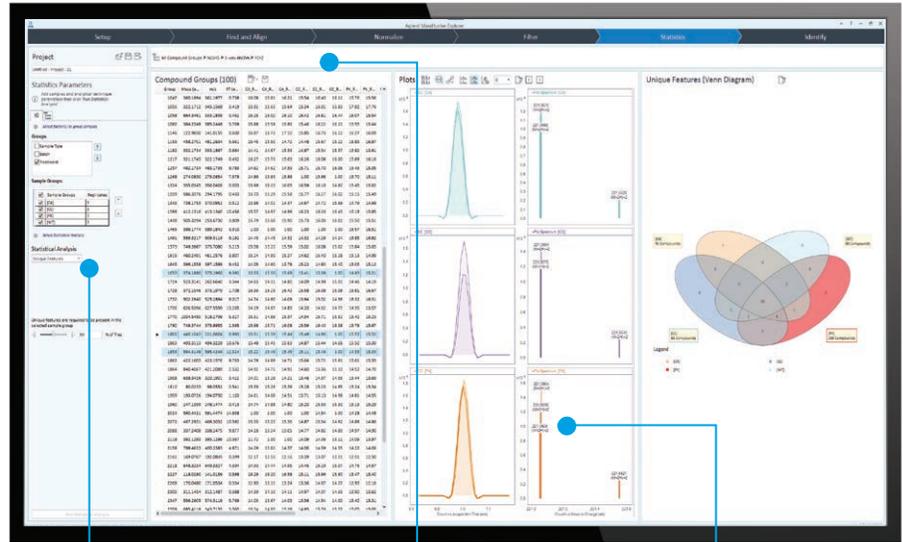


정규화 옵션을 선택합니다.

PCA별 시료 그룹화를 검토합니다.

## 중요한 화합물에 집중

통계 분석 기술은 시료 그룹 간에 상당히 다른(또는 공통적인) 화합물을 찾는 데 도움을 줍니다. T-테스트, fold-change 분석, volcano 플롯, 단방향 또는 양방향 분산 분석, 계층적 군집 분석(HCA)은 모두 관심 화합물을 찾기 위한 도구들입니다. 이러한 기술의 결과는 기기 데이터와 함께 검토되어 즉각적인 시각화와 검증으로 이어집니다.



통계 분석 기술 목록에서 항목을 선택하여 중요한 관심 화합물을 찾습니다.

중요한 화합물에 집중하기 위해 화합물 목록이 어떻게 필터링되었는지 추적합니다.

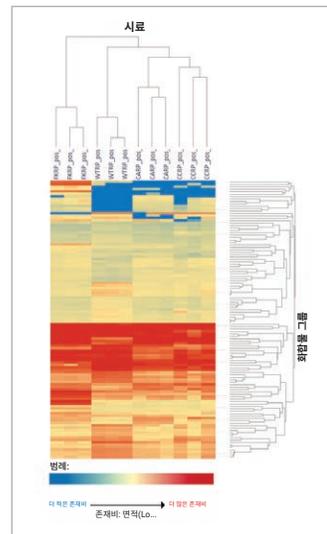
통계 분석 결과와 연결된 EIC 및 스펙트럼을 검토합니다.

연결된 탐색 기능을 사용하면 테이블 또는 플롯(예: 크로마토그램, 스펙트럼 또는 통계 플롯)에서 화합물을 대화식으로 선택하여 결과를 쉽게 해석할 수 있습니다. 모든 플롯과 화합물 목록을 쉽게 내보낼 수 있습니다.

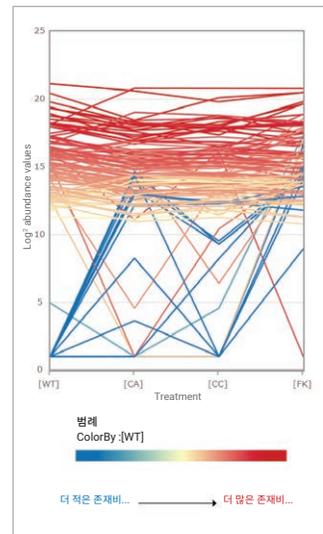
### ANOVA 사후검정 결과



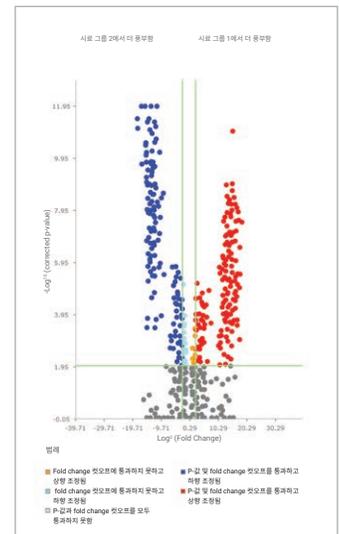
### HCA 플롯



### Fold change 플롯



### Volcano 플롯



## 관심 화합물 식별

관심 화합물이 발견되면 식별 단계에서 추정 식별이 이루어집니다. 화합물 식별 알고리즘은 측정된 데이터를 이론적인 accurate mass 및 동위원소 패턴과 매칭시키고, 필요에 따라 화합물 데이터베이스로 정리된 머무름 시간과 대조하도록 최적화되었습니다.

고도로 선별된 애질런트 화합물 데이터베이스는 MassHunter Explorer에서 직접 사용할 수 있습니다. 이러한 데이터베이스에는 식품, 환경, 법의학, 제약, 추출물/침출물, 수질 스크리닝, 대사체학 및 지질체학과 같은 산업 분야의 관심 화합물이 망라되어 있습니다.

MassBank 또는 MoNA와 같은 개방형 공개 라이브러리와 데이터베이스의 데이터는 Agilent ChemVista 소프트웨어에서 사용할 수 있습니다.

The screenshot displays the Agilent MassHunter Explorer software interface. The main window is titled "Identify" and shows a list of "Compounds Groups (86)". The "Identify Parameter" panel on the left includes options for "Database Search" and "Specify Database". The "Composite MS Spectrum" panel on the right shows a mass spectrum with a base peak at m/z 477.2328. The "Putative Compound Identifications" table lists several candidates, with "Ethyl cellulose" (C20H38O11) being the top match. The "Identification Results: Ethyl cellulose" panel shows detailed scores and retention times for the identified compound.

Group	Mass	m/z	RT	Name	F
265	370.3071	393.2966	12.202	D(2-ethylhexyl) adipate	C21
267	499.3403	560.2534	6.574	Lactamide	C19
317	154.2800	184.2554	6.301	Choline	C18
331	482.2405	221.2466	11.111	α-Ethylol β-D-hydroxyethyl (1-4) glucoside	C21
343	118.0253	181.0220	0.583	Threonolactone	G419
401	211.1436	229.1772	6.331	Acetone	C18
463	410.2176	433.2067	4.654	Igs Tyr Tyr	C19
497	305.3852	389.3413	4.032		
504	247.1904	288.1796	8.454	C4F10M44	C15
587	718.3746	361.2337	0.450		
647	414.2411	417.2374	5.754		
659	454.2640	477.2328	5.051	Ethyl cellulose	C20
757	542.2259	568.2854	5.840		
786	712.4216	587.2317	3.489		
792	155.0677	156.0735	0.368		
808	530.2501	531.2547	5.458	3,6,8-Dehydroallotharone-5-(α-D-glucopyranosyl)-(1-4) glucoside	C24
818	692.3893	347.2054	7.528		

Putative Compound Identifications										
Seq.	Rank	Name	Formula	Score	Mass	Diff	Diff%	RT	RT D.	Spe
1	1	Ethyl cellulose	C20H38O11	62.16	454.2640	5.63	7.56			(M)
2	2	Methyl cellulose	C20H38O11	62.15	454.2440	5.63	2.56			(M)
3	3	Trehalose	C20H38N4O12	44.34	454.2441	8.40	3.82			(M)

Identification Results: Ethyl cellulose						
Species	m/z	Height	Score(M)	Score(mass)	Score(is.abund)	Score(is.spading)
(M+)	477.2328	13,367.58	62.16	72.83	65.54	37.24
m/z	m/z(calc)	Diff(ppm)	Diff(mDa)	Height	Height(calc)	Height %
477.2328	477.2305	4.48	2.14	11,367.58	13,363.03	100.00
478.2380	478.2341	8.79	4.35	3,514.55	3,095.48	36.29

분석물질을  
데이터베이스에 포함된  
화합물과 매칭시킵니다.

추정 식별 증거를  
검토합니다.



환경 분야 응용

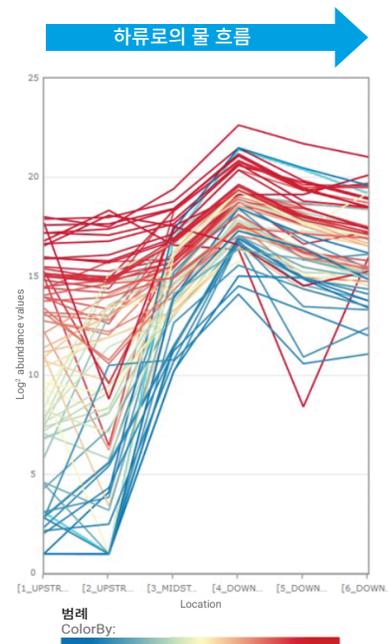
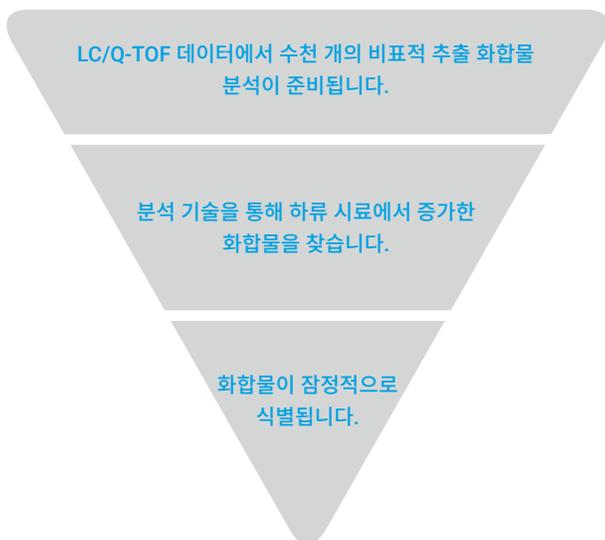
## 강물에서 새로운 오염물질을 찾고 식별

LC/Q-TOF 시스템은 환경을 오염시키는 새로운 오염물질, 대사산물 및 미생물 분해 산물을 탐지하기 위한 최고의 도구입니다. 표준물질을 거의 구할 수 없고 각 시료에서 수천 개의 피크가 검출될 수 있기 때문에 이러한 화학종을 찾고 식별하는 일은 어려울 수 있습니다.

이 예에서 강물 시료는 깨끗한 상류(대조군)와 도심의 하류에서 채취되었습니다. 목표는 수질에 미치는 폐수의 영향을 측정하는 것이었습니다. LC/Q-TOF와 MassHunter Explorer

데이터 해석을 결합한 accurate mass 분석을 통해 연구자들은 하류에서 채취한 시료에서 환경적으로 중요한 화합물을 찾고 추정 식별할 수 있었습니다.

분석 작업자들은 수천 개의 잠재적 피크를 힘들게 평가하는 대신 환경 문제의 중요한 화합물에 집중할 수 있었습니다. 결과: 폐수의 영향을 빠르고 간단하게 특성화하고 알려지거나 알려지지 않은 오염물질을 식별합니다.





## 대사체학 응용 분야

# 대사체에 미치는 장내 마이크로바이옴의 영향 해석

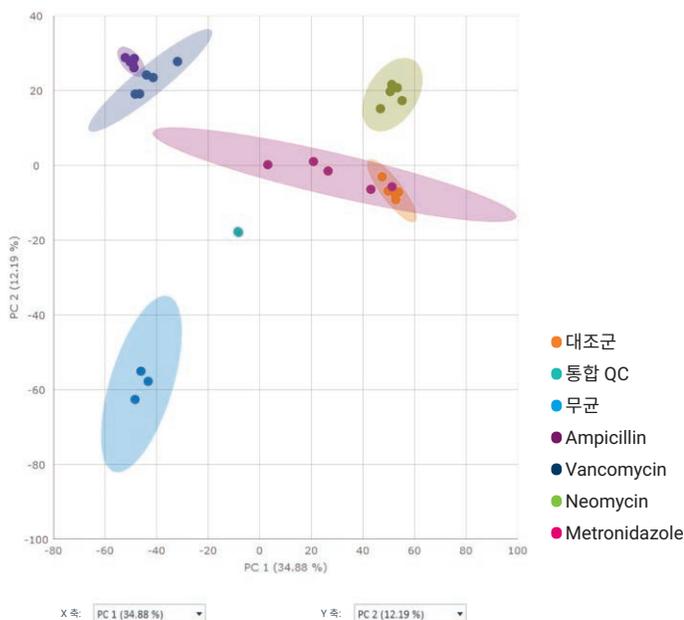
기초, 중개 및 임상 연구를 아우르는 응용 분야에서 Q-TOF LC/MS는 연구원들이 복잡한 시료 매트릭스에서 수천 개의 대사산물을 프로파일링할 수 있도록 하여 화합물 발견을 도와줍니다.

이 예에서는 맹장 대사체에 미치는 항생제 치료의 영향을 조사했습니다. 네 가지 항생제로 치료한 쥐와 마이크로바이옴이

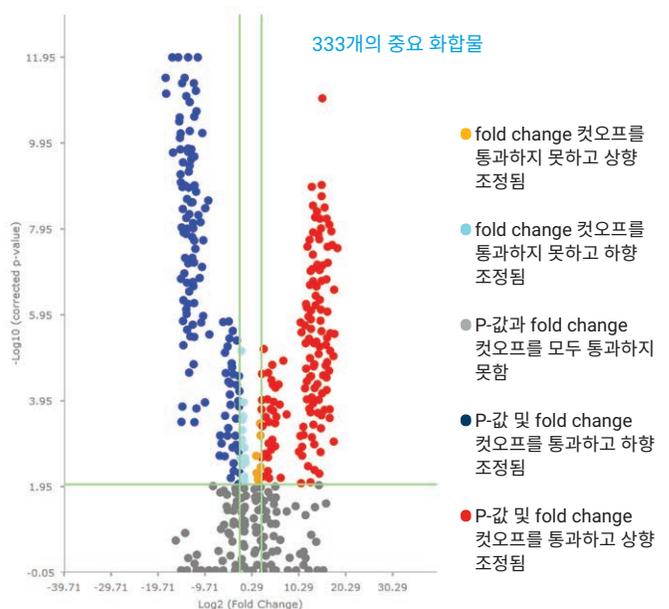
없는 무균 쥐의 맹장 내용물을 새로운 Agilent Revident LC/Q-TOF로 추출하고 분석했습니다.

MassHunter Explorer 데이터 해석은 추가 필터링 및 통계 분석 없이도 즉각적으로 시료를 그룹화하여 보여줍니다. 333개의 잠재적인 미생물 유래 및/또는 미생물 변형 대사산물을 추출하기 위해 volcano 플롯이 사용되었습니다.

5,067개 화합물을 나타내는 35개 시료의 PCA



대조군 대 GF 쥐의 volcano 플롯



수천 개의 잠재적 피크를 힘들게 평가하는 대신 PCA 분석을 통해 시료 그룹을 신속하게 식별하고 volcano 플롯으로 중요한 화합종을 추려내었습니다. 다양한 시료의 빠르고 간단한 특성 분석과 고유한 분석물 표시가 결과로 제공되었습니다.

## 영감을 불러일으키는 인텔리전스

차세대 Agilent LC/Q-TOF 기기 및 소프트웨어는 지속적인 혁신을 기반으로 실험실 운영을 최적화합니다. 계측을 넘어 시간을 절약하는 인텔리전스, 효율적인 워크플로 및 신뢰할 수 있는 파트너가 제공하는 서비스가 포함됩니다. 따라서 영감을 주는 일에 집중하고 그 과정에서 가해지는 모든 도전에 대처할 수 있습니다.

자세한 정보:

[www.agilent.com/chem/masshunter-explorer](http://www.agilent.com/chem/masshunter-explorer)

온라인 구매:

[www.agilent.com/chem/store](http://www.agilent.com/chem/store)

국가별 애질런트 고객 센터 찾기:

[www.agilent.com/chem/contact us](http://www.agilent.com/chem/contact us)

미국 및 캐나다

**1-800-227-9770**

[agilent\\_inquiries@agilent.com](mailto:agilent_inquiries@agilent.com)

유럽

[info\\_agilent@agilent.com](mailto:info_agilent@agilent.com)

아시아 태평양

[inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:inquiry_lsca@agilent.com)

DE72621435

이 정보는 사전 고지 없이 변경될 수 있습니다.

© Agilent Technologies, Inc., 2023  
2023년 6월 5일, 한국에서 발행  
5994-6107KO

한국애질런트테크놀로지스(주)  
대한민국 서울특별시 서초구 강남대로 369,  
A+ 에셋타워 9층, 06621  
전화: 82-80-004-5090 (고객지원센터)  
팩스: 82-2-3452-2451  
이메일: [korea-inquiry\\_lsca@agilent.com](mailto:korea-inquiry_lsca@agilent.com)

